

# *Tópicos Especiais em Instrumentação I*

*Relatório*

## **Estimativa do produto quântico de taxa de reação de reações químicas unidimensionais através de rede neural MLP.**

**Bernardo Schaffazick Caetani**

Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Departamento de Engenharia Elétrica, Curso de Engenharia Elétrica, Tópicos Especiais em Instrumentação I, Prof. Dr. Alexandre Balbinot

E-Mails: bcaetani.poa@gmail.com (B.S.C.);

*Data Início: 30/08/2022; Data Final: 02/10/2022*

---

**Resumo:** Constantes relacionadas à taxa de reações químicas são extremamente valiosas para aplicações industriais. Entretanto, as mesmas, para soluções exatas ou com uma boa aproximação, demandam considerável poder computacional, acarretando elevado custo de tempo e dinheiro. Abordagens que utilizam inteligência computacional para resolução desses problemas vêm sendo largamente empregados, visto que conseguem realizar estimativas com um erro aceitável em um tempo muito reduzido. Dessa forma, esse trabalho se propôs a projetar uma rede neural artificial MLP para a predição do logaritmo do produto quântico de taxa de reação de reações químicas unidimensionais, apresentando arquitetura de rede e tempo de processamento reduzido em relação a redes com funcionalidades similares mas compensado pelo maior erro associado à suas predições: condição aceitável dependendo da área de aplicação.

**Abstract:** Constants related to the rate of chemical reactions are extremely valuable for industrial applications. However, the same, for exact solutions or with a good approximation, demand considerable computational power, causing a high cost of time and money. Approaches that use computational intelligence to solve these problems have been widely used, since they can make estimates with an acceptable error in a very short time. Thus, this work proposed to design an artificial neural network MLP for the prediction of the logarithm of the quantum product of reaction rate of one-dimensional chemical reactions, presenting network architecture and reduced processing time in relation to

networks with similar functionalities but compensated by the biggest error associated with your predictions: acceptable condition depending on application area.

**Palavras-chave:** Indústria, reação química, taxa de reação, rede neural, estimativa.

---

## 1. Introdução

Diversas indústrias trabalham com reações químicas, desde o ramo farmacêutico, bélico, alimentar, materiais, dentre outros. Dessa forma, estimar constantes relacionadas a taxa de reações químicas desejadas é de grande valor para essas indústrias. Soluções exatas de reações químicas demandam um poder computacional e consequentemente tempo de computação e custo extremamente elevados. Teorias que aproximam o comportamento real das reações através de modelos mais simples são empregados em larga escala, como a Teoria de Colisões e a Teoria do Estado Transitório (TST). Entretanto, grande parte dos modelos desconsideram efeitos quânticos (Miller, 1992). Em altas temperaturas, essa simplificação não acarreta erros significativos. Entretanto, quanto menor a temperatura, maior a ocorrência de efeitos quânticos como, por exemplo, o tunelamento (Komp & Valteau, 2020). O cálculo dos efeitos quânticos, mesmo que aproximados, demandam alto custo computacional. Dessa forma, modelos inteligentes com o objetivo de estimar constantes relacionadas às reações químicas têm ganhado espaço, pois conseguem ter uma atuação muito mais rápida que soluções quânticas aproximadas com um desempenho satisfatório, como mostram os trabalhos de Chen *et al.* e de Grambow *et al.* Dessa forma, este trabalho tem como objetivo estimar o logaritmo do produto quântico de taxas de reações químicas unidimensionais através de uma rede neural artificial (ANN) MLP. Costuma-se utilizar apenas reações químicas unidimensionais visto que a computação das mesmas é exponencialmente mais simples e de menor exigência de processamento, além de que reações onde apenas uma dimensão espacial é considerada conseguem ser adaptadas com certa facilidade para reações de maior dimensionalidade espacial (Quickert & Le Roy, 1970).

## 2. Fundamentação Teórica

## 3. Metodologia

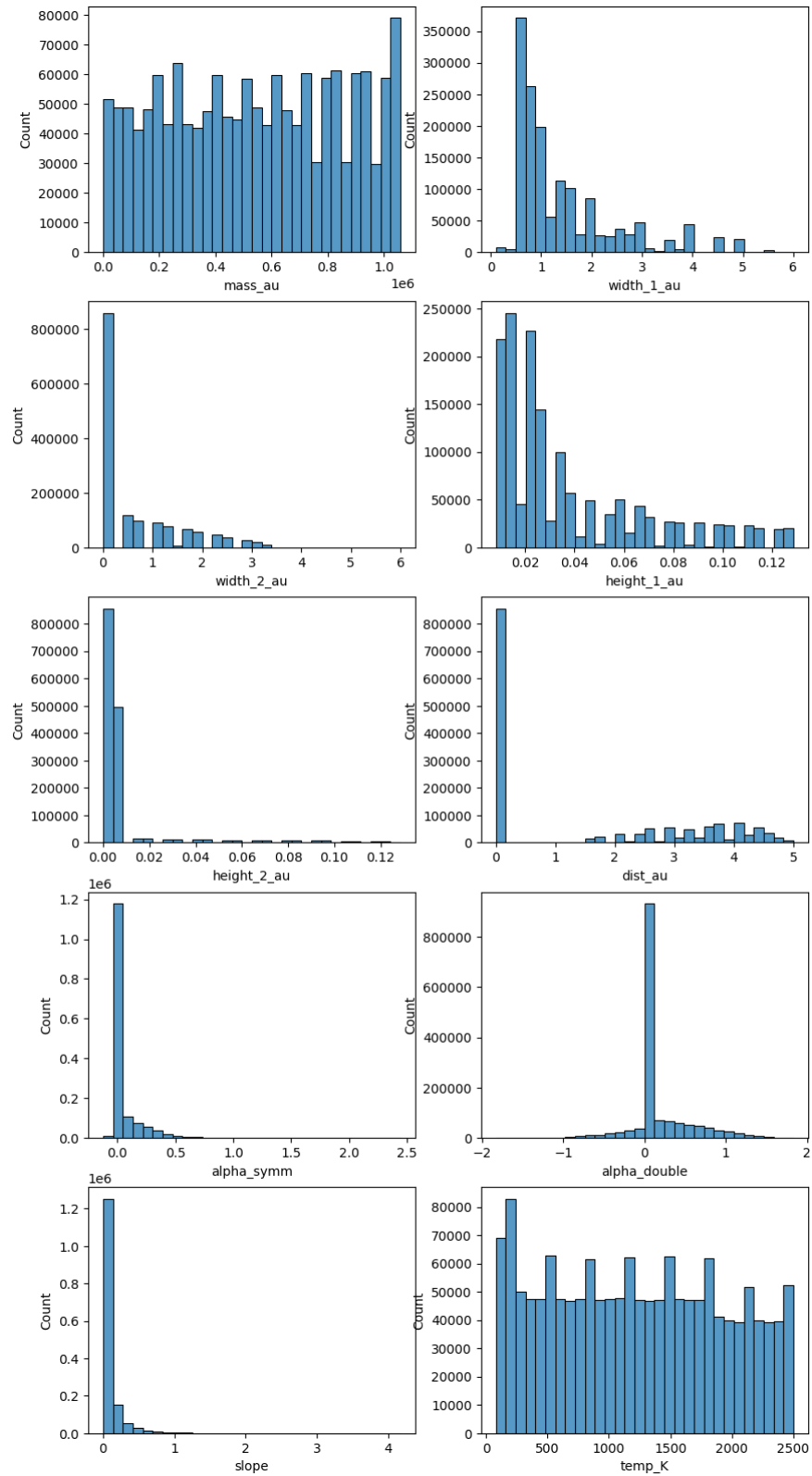
A fim de estimar a taxa de reação química através de uma abordagem quântica, este trabalho se propõe ao projeto de uma rede neural MLP (*Multilayer Perceptron*) para estimar o logaritmo do produto entre a constante de taxa de reação e a função de partição ( $\log k_Q$ ). Para o treinamento da rede projetada, um *dataset* gerado artificialmente com cálculos computacionais de simulação de reações químicas unidimensionais, disponibilizado por Komp & Valteau foi utilizado. As características fornecidas pelos autores, com exceção da taxa de reação  $k_Q$  e seu logaritmo, são a massa dos reagentes (*mass\_au*) em unidades de massa atômica, o comprimento da primeira e segunda (quando presente) barreira de potencial (*width\_1\_au/width\_2\_au*) em unidades atômicas de comprimento (bohr), a altura da primeira e da segunda (quando presente) barreira de potencial (*height\_1\_au/height\_2\_au*) em unidades atômicas de energia (hartree), a distância entre os máximos das barreiras de potencial (*dist\_au*) também em bohr, a constante de simetria para barreiras únicas (*alpha\_symm*), definida como a diferença entre a energia potencial dos produtos e dos reagentes, em hartree, a constante de simetria para barreiras de potencial duplas (*alpha\_double*) adimensional, a inclinação da barreira potencial em hartree/bohr (*slope*) e a temperatura em Kelvin (*temp\_K*). Para o desenvolvimento da rede neural MLP, foi utilizado o *Python* (v. 3.9.2) e as bibliotecas *Pandas* (v. 1.4.2), *numpy* (v. 1.22.3), *seaborn* (v. 0.11.2), *scikit-learn* (v. 1.0.2), *matplotlib* (v. 3.5.1), *tensorflow* (v. 2.9.1) e *keras* (v. 2.9.0).

### 3.1. Escolha das métricas de desempenho

A fim de determinar métricas de desempenho adequadas para avaliação da rede neural MLP projetada, trabalhos similares, envolvendo predição de constantes de taxa de reação, foram consultados. No trabalho de Chen *et al.*, os autores utilizaram regressão linear múltipla (MLR) para estimar as constantes de taxa de reação ( $-\log k_{OH}$ ) para reação entre radicais de hidroxila com compostos orgânicos da atmosfera. Para avaliar o desempenho da curva resultante da regressão, foram utilizadas as métricas de  $R^2$  e Raiz do Erro Médio Quadrático (RMSE). Já no trabalho que deu origem ao *dataset* utilizada neste trabalho, Komp & Valleau utilizaram o Erro Médio Quadrático (MSE) e o Erro Médio Absoluto (MAE) para avaliar o desempenho da rede neural profunda (DNN) projetada pelos mesmos. Além das métricas de desempenho utilizadas pelos autores, também foi consultado o Erro Médio Percentual Absoluto (MAPE), visando enriquecer ainda mais a noção a respeito do desempenho da rede MLP desenvolvida.

### 3.2. Análise e ajustes do dataset

A base de dados utilizada contém aproximadamente 1,5 milhão de dados. Os mesmos foram originados de um *dataset* ainda maior, com cerca de 6,9 milhões de dados. Para selecionar 1,5 milhão dentre os 6,9 milhões de dados, Komp & Valleau primaram para o balanceamento em relação à massa dos reagentes. Entretanto, os autores não tiveram a mesma preocupação para as demais características, fazendo com que uma grande parte das mesmas estivesse desbalanceada, concentrando uma grande quantidade de dados em determinadas faixas de valores. A Figura 1 mostra os histogramas de todas as características.

**Figura 1.** Histograma das características de entrada da rede neural.

Fonte - Autor.

Pode-se observar que características como a massa e a temperatura estão balanceadas. Entretanto, para as demais características, há uma intensa concentração nos valores assumidos pelas variáveis, deixando-as desbalanceadas. A correção desse desbalanceamento acarretaria, ou grande perda de dados, algo indesejável devido a complexidade da área de atuação e a consequente necessidade de uma grande quantidade de dados, ou na geração de um volume considerável de dados artificiais, algo não desejável, visto que, devido a natureza caótica da aplicação, onde pequenas mudanças nas entradas afetam significativamente o comportamento da saída, dificilmente esses valores seriam representativos. Dessa forma, optou-se por manter a estrutura desbalanceada inicial, entretanto, após a definição final do modelo de rede neural MLP, o comportamento de suas estimativas para regiões de valores das características com poucos dados precisa ser validado. Fazendo isso, consegue-se estipular o *range* de funcionamento adequado da rede projetada.

O *dataset* utilizado para o treinamento, validação e teste da rede neural MLP projetada no presente trabalho não havia linhas com valores indefinidos, visto que foi gerado de forma artificial, não necessitando de remoção prévia das linhas inutilizáveis. O *dataset* foi aleatorizado e normalizado antes da separação dos conjuntos de treinamento, de validação e de teste. A técnica de padronização foi utilizada, baseado no trabalho de Komp & Valleau, onde os dados de cada característica foram recalculados através da expressão (1), onde ‘z’ é o dado padronizado, ‘x’ é o dado, ‘μ’ é a média e ‘σ’ é o desvio padrão.

$$z = \frac{x - \mu}{\sigma} \quad (1)$$

A base de dados foi por fim dividida em conjuntos de treinamento, de validação e de teste. Como uma grande quantidade de dados estava disponível e carga computacional precisava ser economizada no treinamento da rede neural, o conjunto de treinamento assumiu 60% dos dados disponíveis. Os conjuntos de validação e de teste receberam 20% dos dados cada.

### 3.3. Escolha das características de entrada

Para definir quais as características de entrada fornecidas que seriam utilizadas para alimentar a rede neural MLP realizou-se testes de correlação. Deseja-se que as variáveis de entrada tenham baixa correlação entre si, de forma a não fornecer a mesma informação duplicada para a rede, podendo prejudicar seu desempenho. Dessa forma, utilizou-se as matrizes de correlação linear de Pearson para essa avaliação. Características com elevada correlação precisam ser descartadas ou passar por algum tipo de tratamento para serem inseridas no sistema sem prejudicá-lo. Para características que apresentaram alta correlação, utilizou-se o método do PCA (*Principal Component Analysis*), baseado no trabalho de Halkjær & Winther, onde a técnica foi empregada visando a redução da correlação entre as características. Além disso, testes de desempenho da rede, com configurações de hiperparâmetros pré-definidas, foram realizadas, de modo a validar a melhora do desempenho com o uso do PCA.

### 3.4. Escolha dos hiperparâmetros

Definidas as entradas do sistema, soluções candidatas à melhor configuração da rede foram encontradas através de duas pesquisas em grade em série. Devido a alta exigência computacional, a quantidade de variações dos hiperparâmetros e número de épocas foi reduzido e a otimização precisou ser dividida em duas etapas. A vantagem da realização dessa abordagem é a eliminação prévia de diversas combinações com menos indicações de solução candidata. Existe o risco de soluções candidatas serem precocemente eliminadas, mas o mesmo é compensado pelo consequente alívio computacional que foi priorizado na execução do projeto.

Uma pesquisa empírica prévia foi realizada, onde foram definidos os hiperparâmetros que seriam variados e seus respectivos valores. Na primeira iteração da pesquisa em grande, os

hiperparâmetros e seus respectivos valores são expostos na Tabela 1, resultando em um total de 150 combinações de hiperparâmetros distintos.

**Tabela 1.** Hiperparâmetros da primeira pesquisa em grade.

<b>Primeira pesquisa em grade</b>	
<b>Épocas</b>	5
<b>Otimizador</b>	Adam
<b>Neurônios (1ª camada oculta)</b>	[1, 3, 5, 7, 9]
<b>Neurônios (2ª camada oculta)</b>	[1, 3, 5, 7, 9]
<b>Taxa de aprendizado</b>	[0.001, 0.0001]
<b>Tamanho de <i>batch</i></b>	150
<b>Função de ativação</b>	['sigmoid', 'tanh', 'relu']
<b>Função de perda</b>	MSE

Fonte - Autor.

Após a primeira pesquisa em grade, as 10 melhores configurações para cada uma das 5 métricas de avaliação na predição do conjunto de validação foram selecionadas para a segunda pesquisa em grade. Na segunda pesquisa em grade, apenas foram modificados os hiperparâmetros do tamanho de *batch* e da taxa de aprendizado, como mostra a Tabela 2, visando complementar a primeira pesquisa em grade.

**Tabela 2.** Hiperparâmetros da segunda pesquisa em grade.

<b>Segunda pesquisa em grade</b>	
<b>Épocas</b>	5
<b>Otimizador</b>	Adam
<b>Neurônios (1ª camada oculta)</b>	configurações selecionadas
<b>Neurônios (2ª camada oculta)</b>	configurações selecionadas
<b>Taxa de aprendizado</b>	[0.01, 0.001]
<b>Tamanho de <i>batch</i></b>	[100, 150, 200]
<b>Função de ativação</b>	configurações selecionadas
<b>Função de perda</b>	MSE

Fonte - Autor.

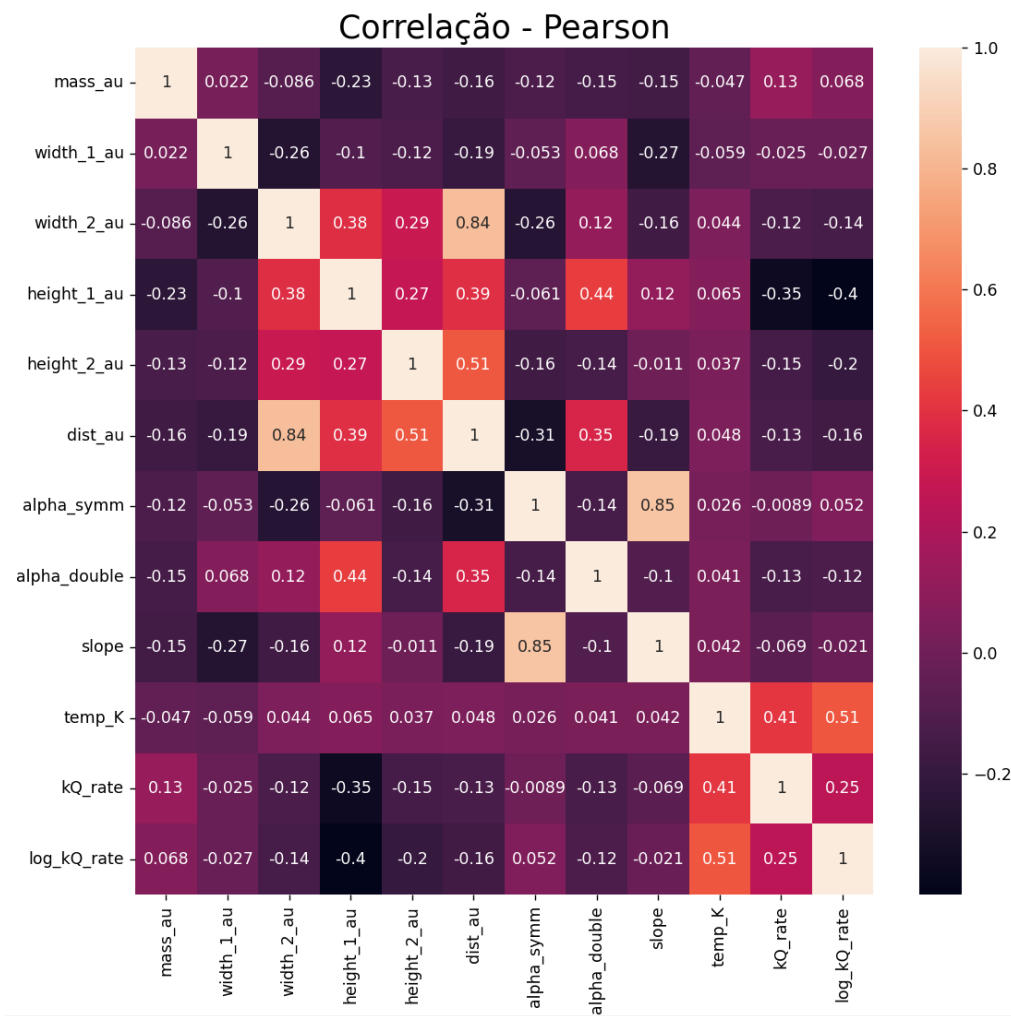
Feito isso, os melhores 5 modelos, que obtiveram melhores métricas de desempenho na estimativa do conjunto de validação, foram selecionados. Com os melhores modelos definidos, realizou-se um novo treinamento com os mesmos, mas com treinamento de 100 épocas. Ao final do treinamento, o conjunto de validação foi novamente estimado e o melhor modelo foi selecionado. Para validação final da arquitetura, treinou-se o modelo por 500 épocas e observou-se seus resultados, comparando-os com os obtidos por Komp & Valteau.

## 4. Resultados e Discussões

### 4.1 Análise de correlação

A matriz de correlação linear de Pearson é exposta na Figura 2. Analisando-a, podemos observar a alta correlação entre a distância entre os máximos das barreiras de potencial (*dist\_au*) e a largura da segunda barreira de potencial (*width\_2\_au*). Como a distância entre os máximos das barreiras de potencial necessita de no mínimo duas barreiras de potencial para ser diferente de zero, é lógico que ambas as características tenham elevada correlação. Além disso, o coeficiente de simetria de barreiras únicas (*alpha\_symm*) também possui alta correlação com a inclinação da barreira de potencial (*slope*). Como o coeficiente de simetria de barreiras únicas é definido como a diferença entre os níveis de energia potencial dos produtos com a dos reagentes, quanto maior for essa diferença, ou seja, maior o coeficiente de simetria, maior será a inclinação para uma mesma largura. Dessa forma, mesmo as características apresentando alta correlação, elas representam qualidades distintas do sistema, sendo indesejada sua não utilização. Dessa forma, a aplicação do PCA, visando a inclusão desses dados no modelo ao mesmo tempo que a aprendizagem do modelo não é significativamente afetada, é justificada. Realizou-se o PCA da distância entre os máximos com a largura da segunda barreira de potencial, e também da inclinação da barreira de potencial com o coeficiente de simetria. Em ambos os casos, as duas dimensões de entrada foram reduzidas para uma única dimensão de saída.

**Figura 2.** Matriz de correlação linear de Pearson das características.



Fonte - Autor.

## 4.2. Otimização de hiperparâmetros

Este subcapítulo se propõe a expor os resultados do processo de otimização dos hiperparâmetros da rede MLP.

### 4.2.1. Resultados da primeira pesquisa em grade

Após a realização da primeira pesquisa em grade, selecionou-se as 10 melhores configurações de rede para cada métrica de desempenho escolhida. Devido a similaridade entre as métricas, diversas configurações estiveram entre as 10 melhores nas 5 métricas de desempenho definidas, o que resultou em apenas 12 configurações escolhidas, em um total possível de 50 (10 [melhores configurações para cada métrica] \* 5 [métricas]). As melhores arquiteturas obtidas e seus resultados são expostos na Tabela 3. As mesmas foram levadas para servirem como base para a segunda pesquisa em grade.

**Tabela 3.** Melhores configurações de rede neural MLP obtidas na primeira pesquisa em grade.

Nro. neurônios (1)	Nro. neurônios (2)	Taxa de aprendizado	Função de ativação	Tamanho de batch	R <sup>2</sup>	MSE	RMSE	MAE	MAPE
9	5	0,001	tanh	150	0,986	0,014	0,119	0,041	0,536
9	9	0,001	tanh	150	0,986	0,014	0,120	0,034	0,484
7	9	0,001	tanh	150	0,984	0,016	0,126	0,034	0,513
5	7	0,001	tanh	150	0,984	0,016	0,127	0,040	0,554
5	9	0,001	tanh	150	0,984	0,016	0,128	0,040	0,573
7	7	0,001	tanh	150	0,983	0,017	0,131	0,039	0,527
7	5	0,001	tanh	150	0,982	0,018	0,134	0,043	0,582
9	7	0,001	relu	150	0,982	0,018	0,134	0,046	0,524
9	3	0,001	tanh	150	0,982	0,018	0,135	0,046	0,552
9	7	0,001	tanh	150	0,981	0,019	0,138	0,041	0,523
9	5	0,001	sigmoid	150	0,979	0,021	0,144	0,041	0,564
5	5	0,001	tanh	150	0,981	0,019	0,139	0,044	0,674

Fonte - Autor.

### 4.2.2. Resultados da segunda pesquisa em grade

Na execução da segunda pesquisa em grade, apenas parâmetros como o tamanho de *batch* e a taxa de aprendizado foram testadas. Os melhores modelos para cada métrica foram selecionados, de forma a separar os 5 melhores. A priorização das métricas de desempenho foi por R<sup>2</sup>, seguido por MSE e por MAE. Os 5 melhores modelos são mostrados na Tabela 4.



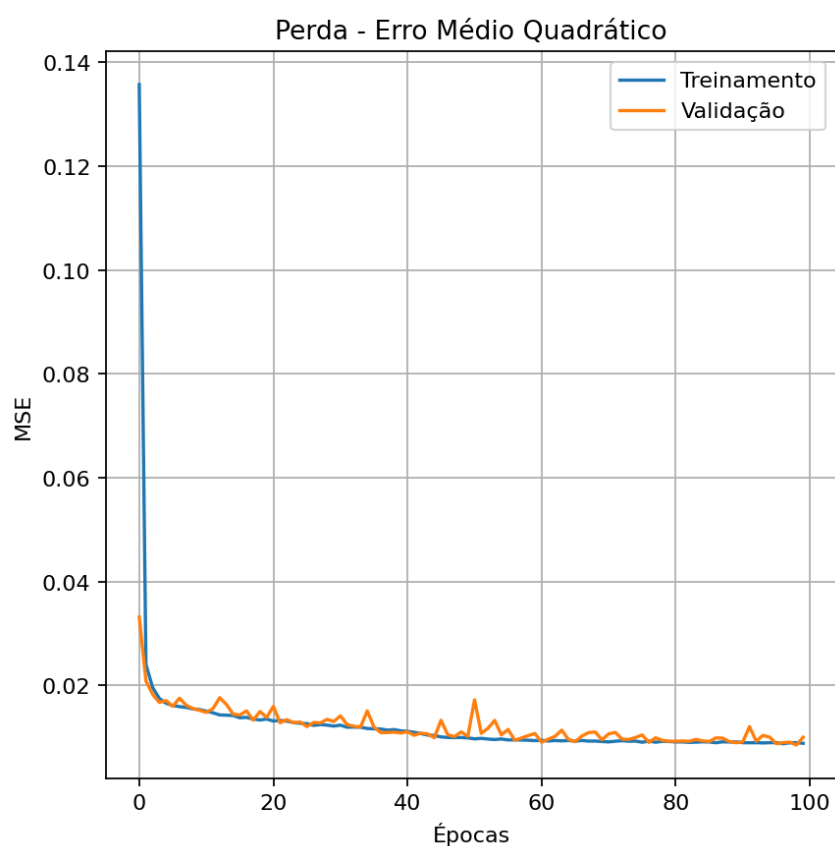
**Tabela 4.** Melhores configurações de rede neural MLP obtidas na segunda pesquisa em grade.

Índice	Nro. neurônios (1)	Nro. neurônios (2)	Taxa de aprendizado	Função de ativação	Tamanho de batch	R <sup>2</sup>	MSE	RMSE	MAE	MAPE
1	9	5	0,001	tanh	150	0,987	0,014	0,116	0,029	0,281
2	7	9	0,001	tanh	150	0,986	0,014	0,119	0,033	0,416
3	9	9	0,001	tanh	200	0,986	0,014	0,12	0,028	0,445
4	7	5	0,01	tanh	200	0,985	0,015	0,122	0,053	0,766
5	9	5	0,001	tanh	100	0,985	0,015	0,123	0,036	0,382

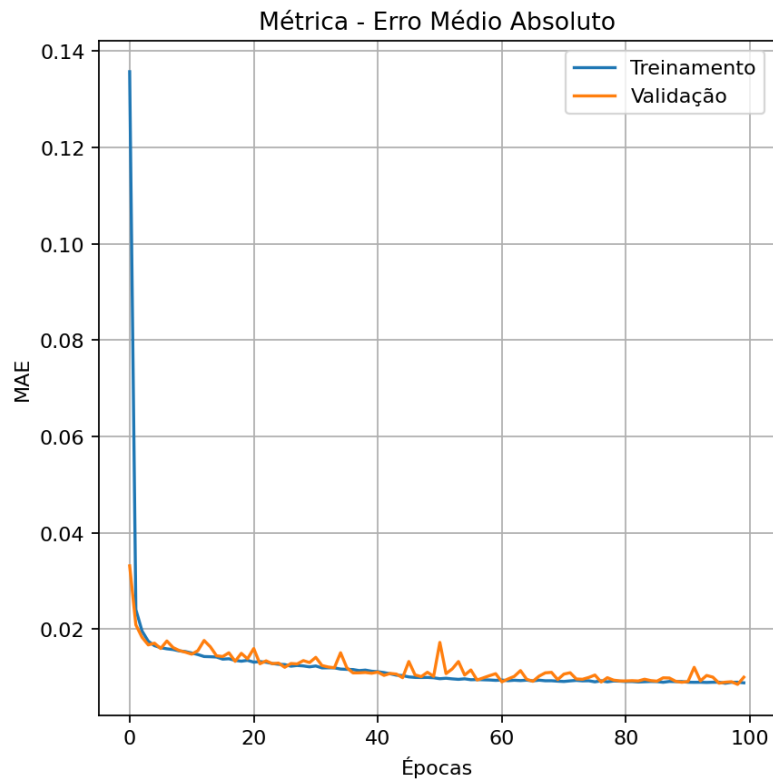
Fonte - Autor.

#### 4.2.3. Avaliação do comportamento ao longa das épocas

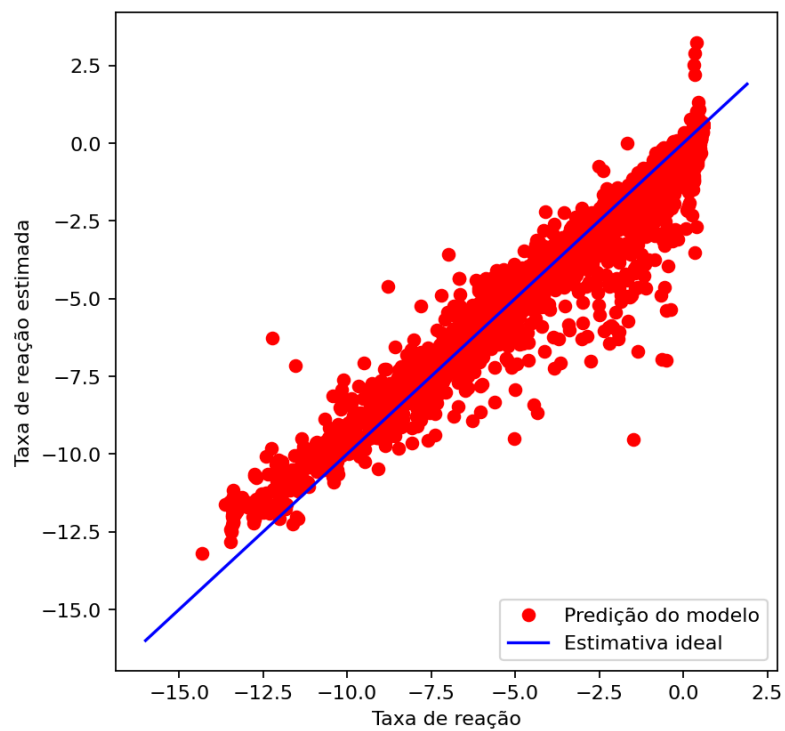
A fim de validar os modelos selecionados e definir uma única arquitetura, usou-se os hiperparâmetros obtidos para um treinamento longo de 100 épocas e calculou-se suas respectivas métricas de desempenho, novamente para a predição do conjunto de validação. Os resultados dos modelos são mostrados nas figuras seguintes.

**Figura 3.** Função de perda (MSE) em função das épocas do modelo de índice 1.

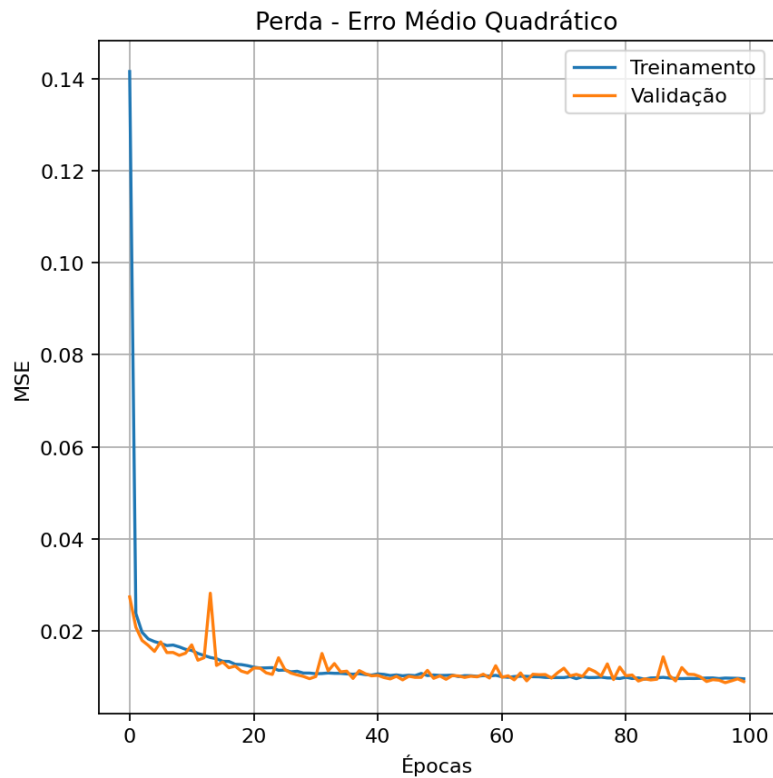
Fonte - Autor.

**Figura 4.** Métrica de desempenho (MAE) em função das épocas do modelo de índice 1.

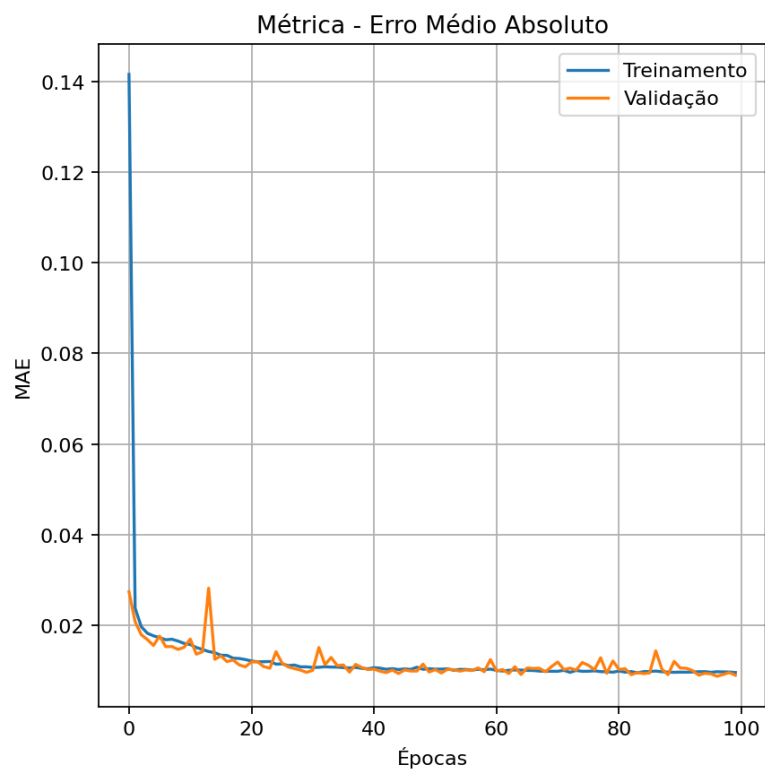
Fonte - Autor.

**Figura 5.** Predição final do conjunto validação do modelo de índice 1.

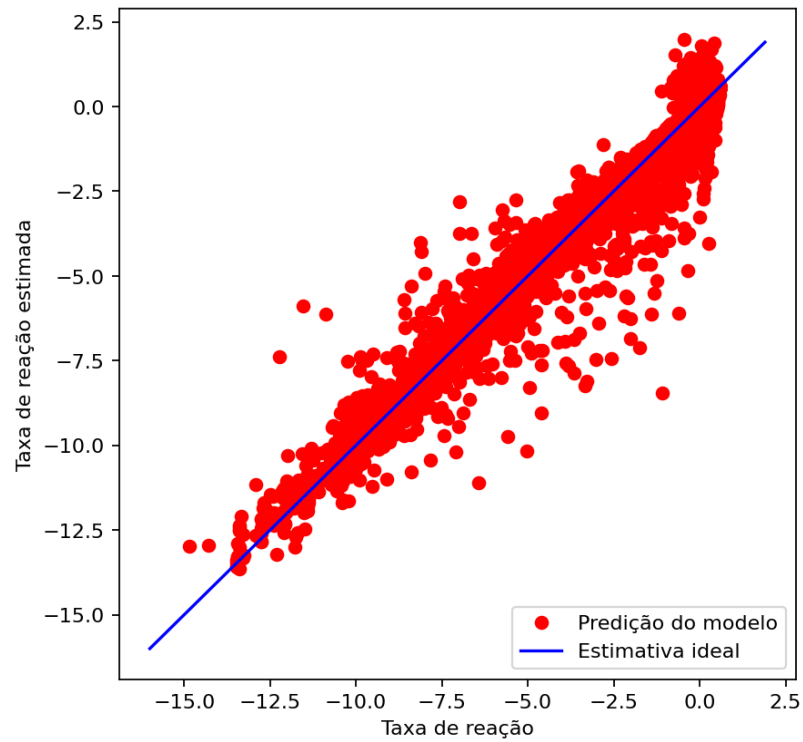
Fonte - Autor.

**Figura 6.** Função de perda (MSE) em função das épocas do modelo de índice 2.

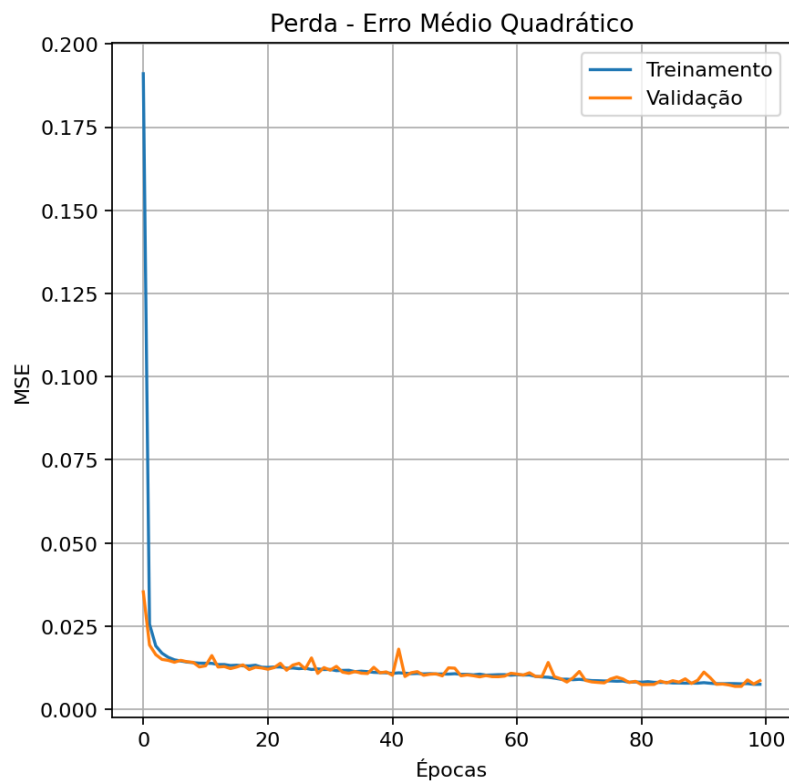
Fonte - Autor.

**Figura 7.** Métrica de desempenho (MAE) em função das épocas do modelo de índice 2.

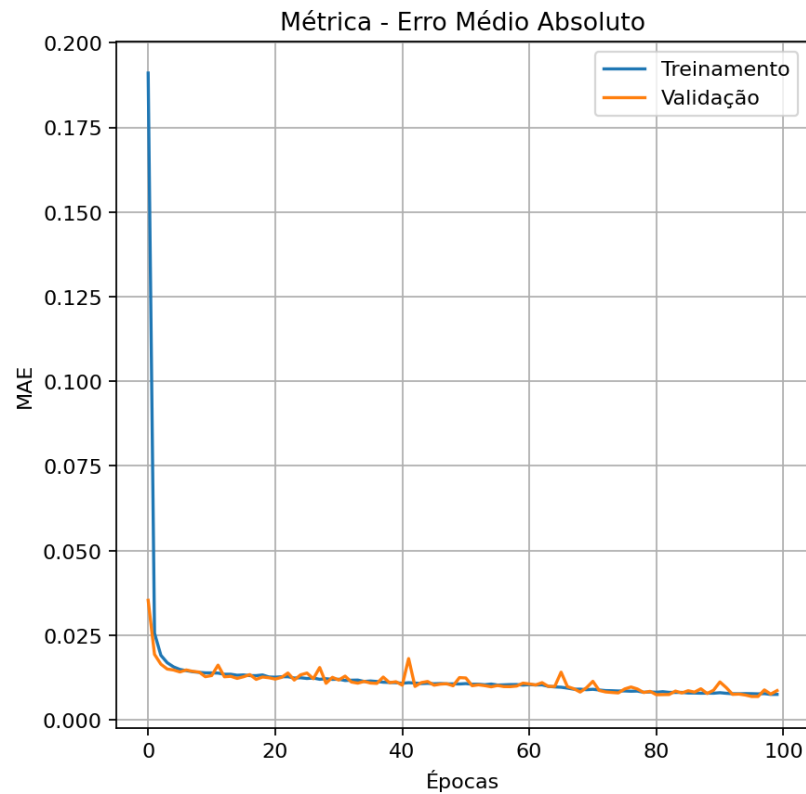
Fonte - Autor.

**Figura 8.** Predição final do conjunto validação do modelo de índice 2.

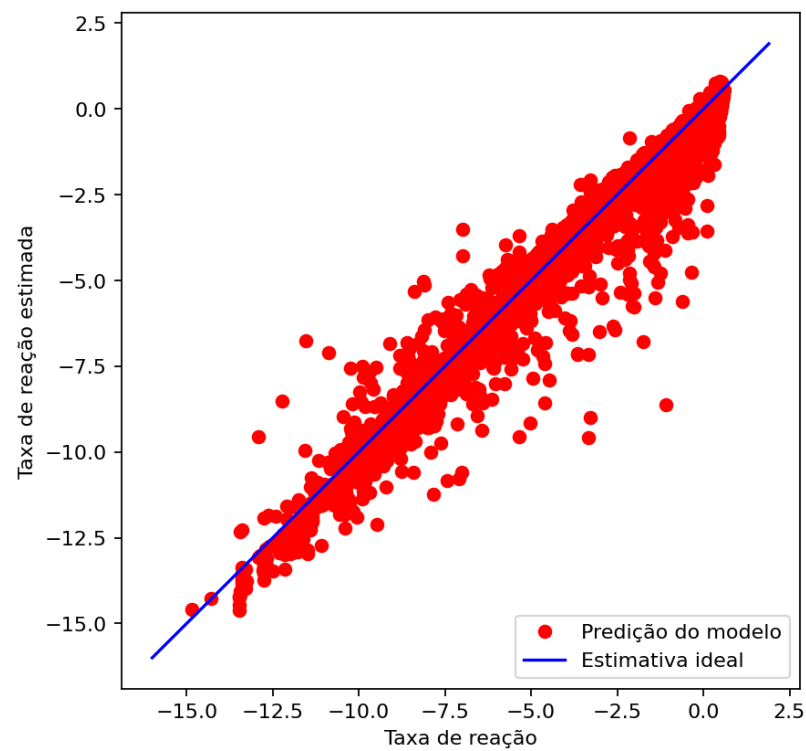
Fonte - Autor.

**Figura 9.** Função de perda (MSE) em função das épocas do modelo de índice 3.

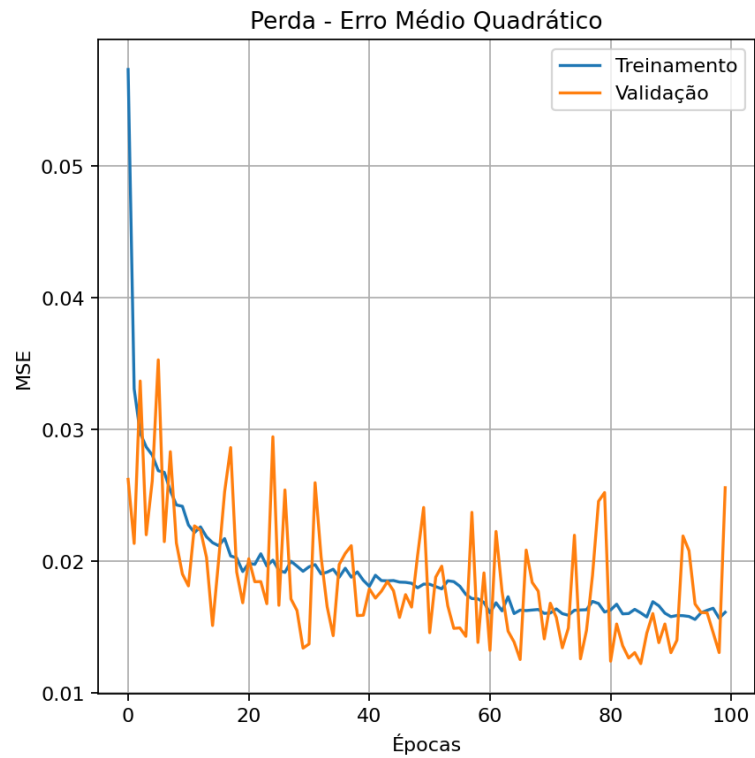
Fonte - Autor.

**Figura 10.** Métrica de desempenho (MAE) em função das épocas do modelo de índice 3.

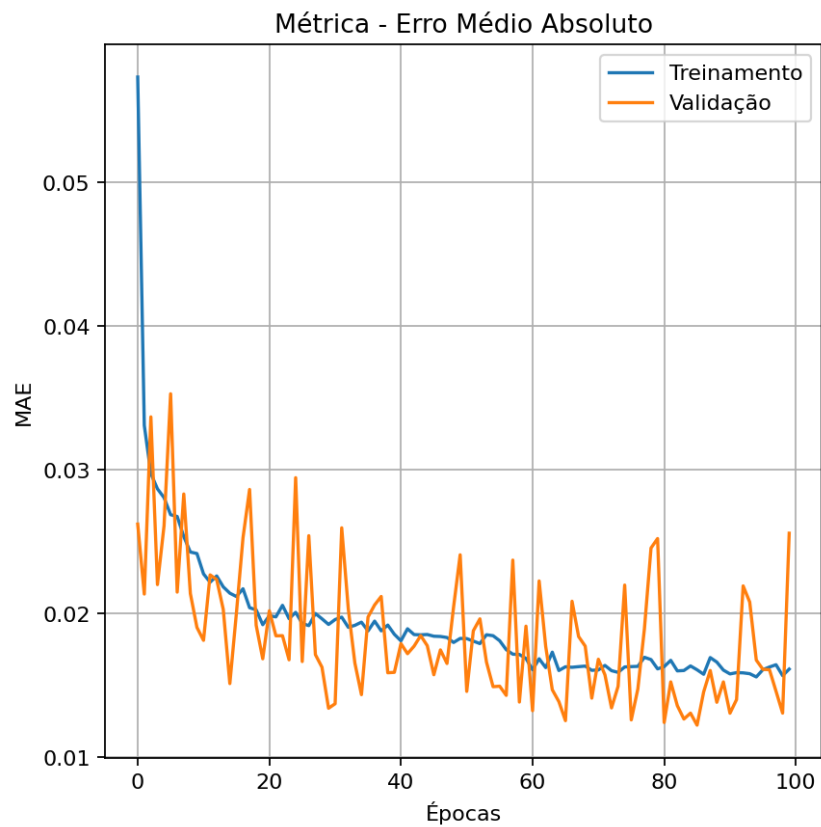
Fonte - Autor.

**Figura 11.** Predição final do conjunto validação do modelo de índice 3.

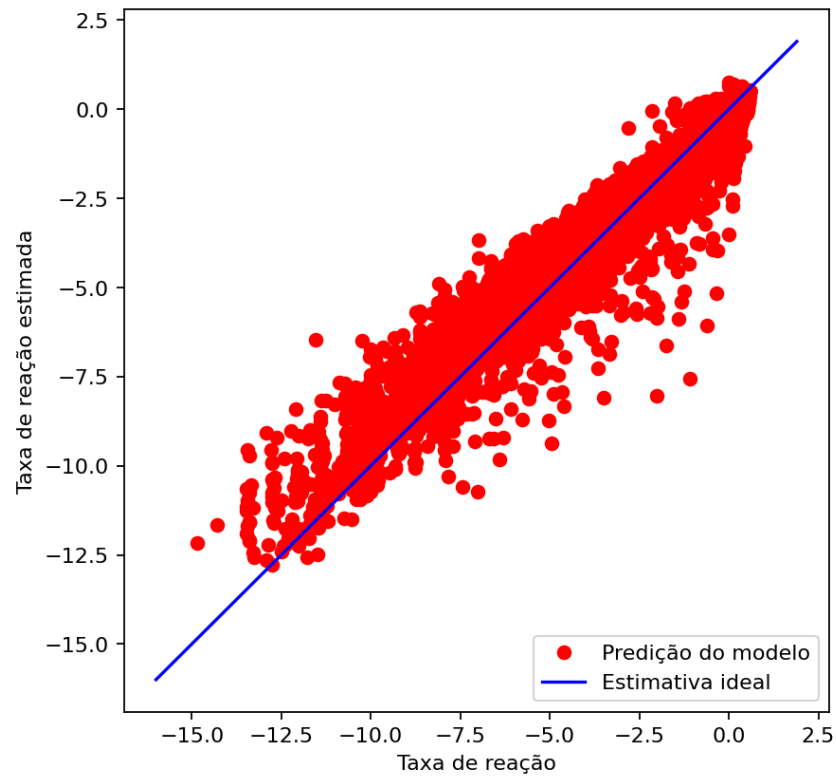
Fonte - Autor.

**Figura 12.** Função de perda (MSE) em função das épocas do modelo de índice 4.

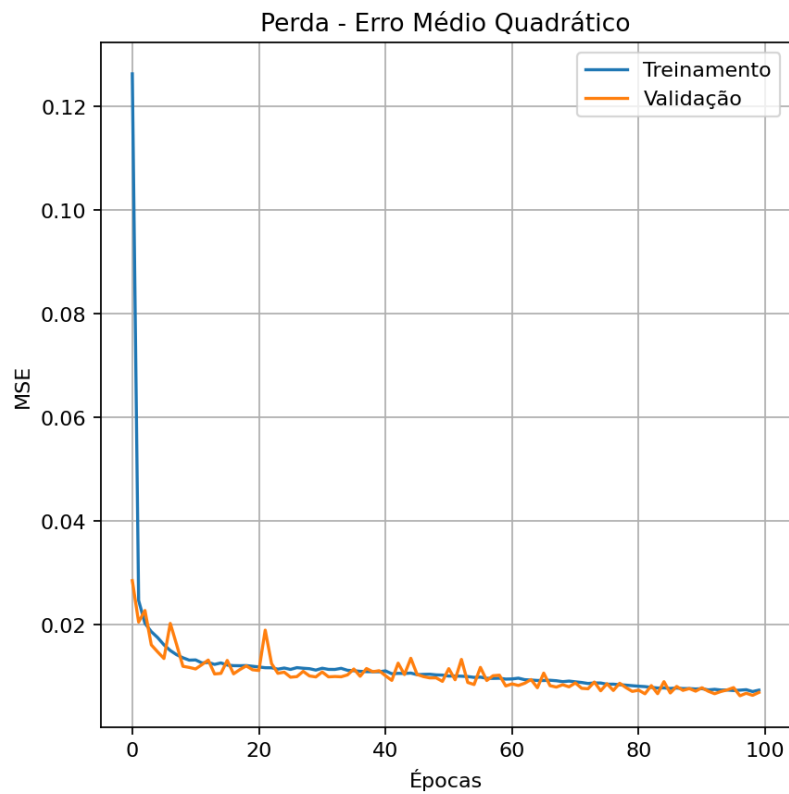
Fonte - Autor.

**Figura 13.** Métrica de desempenho (MAE) em função das épocas do modelo de índice 4.

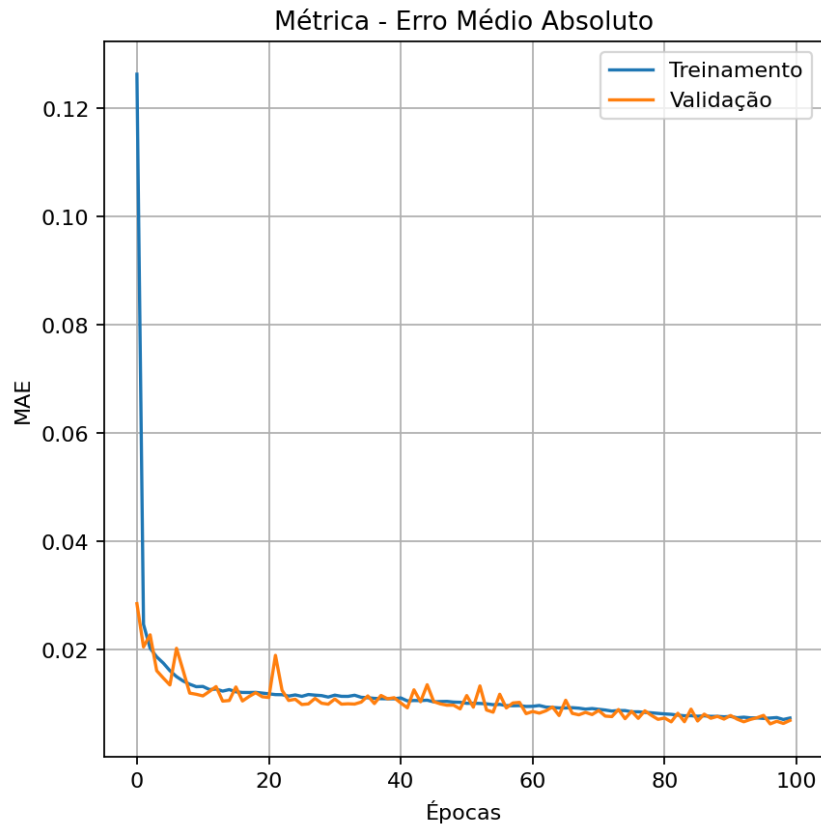
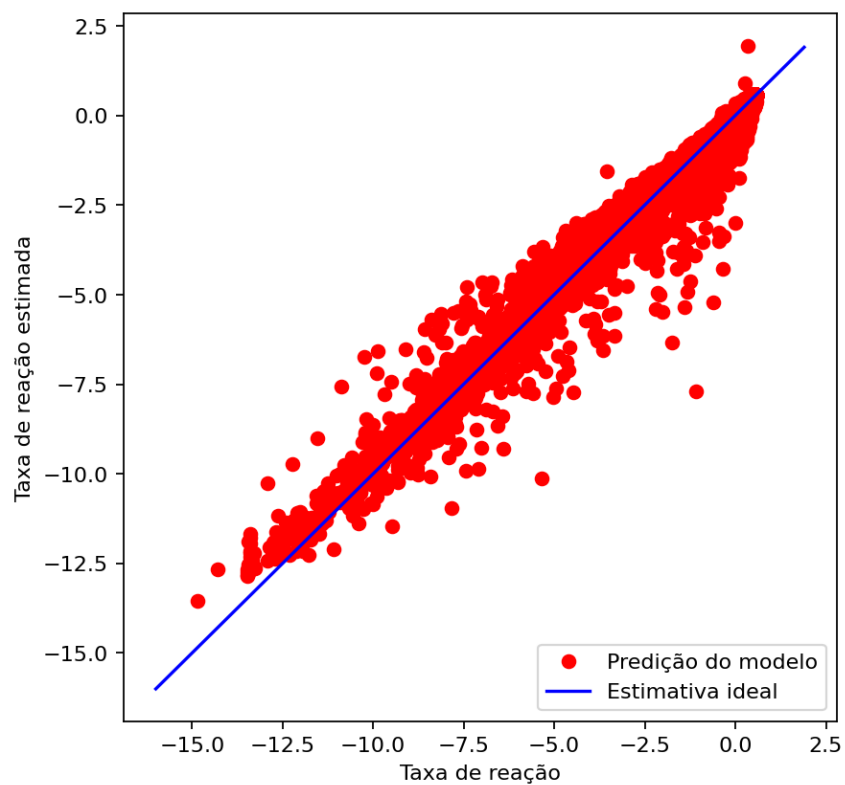
Fonte - Autor.

**Figura 14.** Predição final do conjunto validação do modelo de índice 4.

Fonte - Autor.

**Figura 15.** Função de perda (MSE) em função das épocas do modelo de índice 5.

Fonte - Autor.

**Figura 16.** Métrica de desempenho (MAE) em função das épocas do modelo de índice 5.**Figura 17.** Predição final do conjunto validação do modelo de índice 5.



Analisando o desempenho dos 5 modelos em função das épocas, podemos perceber que o modelo com índice 4 apresenta uma variabilidade de desempenho na predição do conjunto validação muito mais elevada quando comparada aos outros modelos. O bom desempenho dessa configuração se deu apenas pelo mesmo ter sido selecionado em um mínimo local. Dessa forma, o modelo 4 está descartado, visto que não aprende corretamente o comportamento da saída. Para definição do modelo, avaliou-se o desempenho dos mesmos na predição do conjunto validação, mostrada na Tabela 5.

**Tabela 5.** Desempenho dos modelos selecionados na segunda pesquisa em grade, após treinamento de 100 épocas.

Índice	Nro. neurônios (1)	Nro. neurônios (2)	Taxa de aprendizado	Função de ativação	Tamanho de <i>batch</i>	R <sup>2</sup>	MSE	RMSE	MAE	MAPE
1	9	5	0,001	tanh	100	0,993	0,007	0,083	0,027	0,459
2	7	9	0,001	tanh	150	0,991	0,009	0,095	0,028	0,393
3	9	9	0,001	tanh	200	0,991	0,009	0,093	0,025	0,264
4	7	5	0,01	tanh	200	0,974	0,026	0,160	0,068	0,504
5	9	5	0,001	tanh	150	0,988	0,011	0,107	0,035	0,516

Fonte - Autor.

Observando os valores da Tabela 5, conclui-se que o modelo 1 apresenta melhor desempenho em 3 das 5 métricas definidas, duas delas sendo o R<sup>2</sup> e o MSE, sendo as mesmas de maior relevância devido as métricas utilizadas historicamente na área de aplicação. Além disso, o segundo melhor modelo de índice 3, apresenta um número de neurônios na segunda camada consideravelmente maior que o melhor modelo, demandando maior carga computacional. Além disso, seu número de *batch* é o dobro do modelo 1, o que acarreta maior demanda de elemento memória. Dessa forma, o modelo 1 foi escolhido.

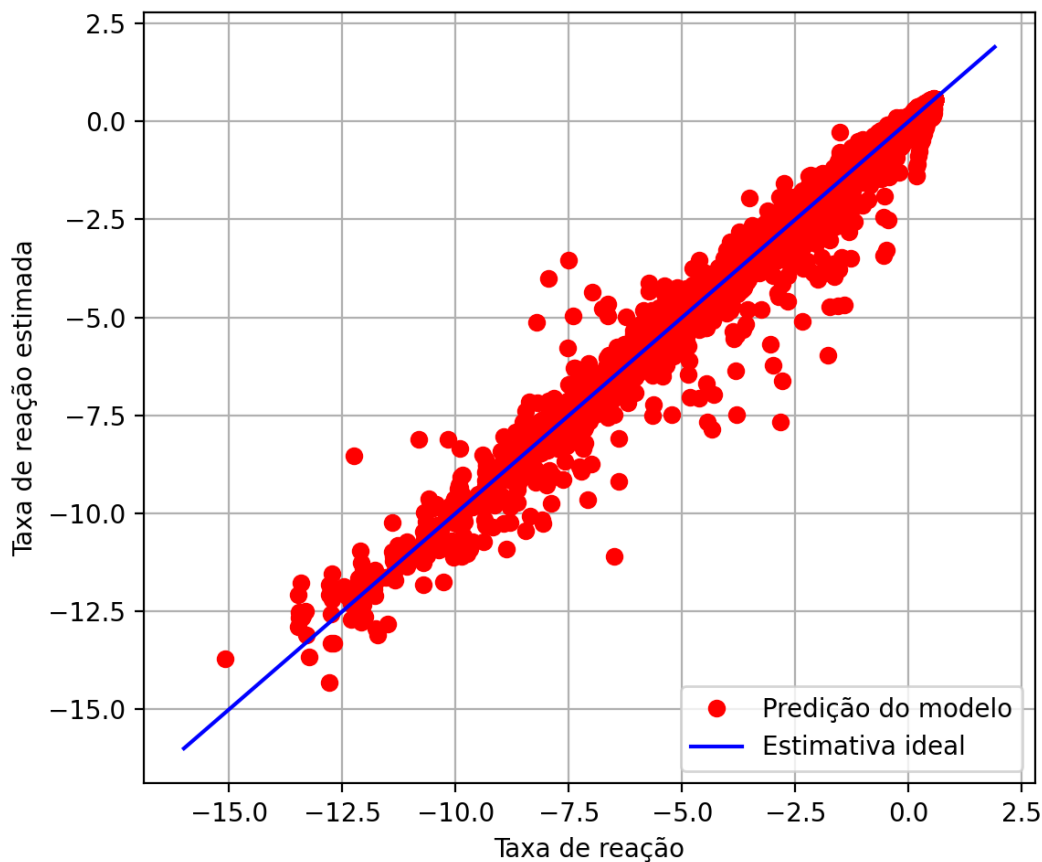
#### 4.3. Desempenho final da rede neural MLP

Definida a solução candidata, treinou-se a arquitetura por um total de 500 épocas para realizar a predição do conjunto de teste, para avaliar o real desempenho do modelo. Dessa forma, após o treinamento, o modelo obteve as métricas de desempenho na estimativa do conjunto de teste mostradas na Tabela 6, e a predição é ilustrada na Figura 18.

**Tabela 6.** Métricas de desempenho final da rede MLP.

R <sup>2</sup>	0,994
MSE	0,006
RMSE	0,079
MAE	0,023
MAPE	0,282

Fonte - Autor.

**Figura 18.** Comportamento da predição do conjunto teste do modelo.

**Fonte -** Autor.

No trabalho de Komp & Valleau, que originou a base de dados, as autoras encontraram uma configuração de três camadas ocultas (64, 24, 24), treinadas 3000 épocas, com tamanho de *batch* de 128, função de ativação nas camadas ocultas *softsign* e função de ativação da camada de saída *tanh*, com uma taxa de aprendizado de 0.0005. O modelo projetado pelas mesmas conseguiu atingir um MAE de 1,1%. A rede neural MLP desenvolvida no presente trabalho apresenta apenas duas camadas ocultas (9, 5), demandando uma quantidade exponencialmente menor de poder de computação que a rede projetada originalmente. O MAE obtido pela rede projetada é de aproximadamente 2,3%. As outras métricas de desempenho apresentam uma piora em relação a estimativa do conjunto validação. Entretanto, em certo nível essa variação é aceitável devido à natureza aleatória da disposição dos dados e configurações iniciais da rede. Avaliando as métricas de desempenho, é possível concluir que o modelo não sofreu com o problema de *overfitting* de forma significativa, que seria diagnosticado através de uma piora considerável no desempenho e detectado nas curvas de perda da validação em função das épocas.

## 5. Conclusão

O modelo desenvolvido apresenta um MAE consideravelmente mais elevado que a rede original, entretanto, devido a menor exigência computacional, a atuação da MLP é muito mais rápida. Além disso, as demais métricas do modelo desenvolvido estão satisfatórias e de acordo com o esperado. Dessa forma, dependendo da aplicação desejada para o sistema, a rede neural MLP projetada pode ser de maior interesse, quando não há grande necessidade de precisão nas estimativas e se deseja uma maior velocidade de resposta de atuação. Em trabalhos futuros, pretende-se realizar uma pesquisa

em grade envolvendo um número maior de hiperparâmetros e também validar o comportamento da estimativa do modelo para os diferentes valores de cada entrada, a fim de avaliar o desempenho do modelo para faixas de valores de características com relativamente poucos dados inseridos no treinamento da rede, no caso das características desbalanceadas.

### **Referências Bibliográficas**

1. Komp, E., Vallueau, S., Machine Learning Quantum Reaction Rate Constants. J. Phys. Chem. A, 2020, 13 p.
2. Chen, Z., Yu, X., Huang, X., Zhang, S., Prediction of Reaction Rate Constants of Hydroxyl Radical with Organic Compounds. Journal of the Chilean Chemical Society, 2014, 8 p.
3. Halkjær, S., Winther, O., The effect of correlated input data on the dynamics of learning. CONNECT, The Niels Bohr Institute, 1996, 7 p.
4. Miller, W., Beyond Transition-State Theory: A Rigorous Quantum Theory of Chemical Reaction Rates. Acc. Chem. Res, 1993, 8 p.
5. Quickert, K., Le Roy, D., Permeability of One-Dimensional Potential Barriers. 1970, 10 p.
6. Grambow, C., Pattanaik, L., Green, W., Deep Learning of Activation Energies. J. Phys. Chem. Lett., 2020, 6 p.

©2021 dos autores; disciplina de Tópicos Especiais em Instrumentação I, UFRGS, DELET, RS, Brasil.